

PROBLEMA 1

Batch scheduler (gestione code)

Un gruppo di ricerca intende acquistare un certo numero di server da aggiungere come nodi di calcolo ad un cluster HPC dipartimentale. Si vorrebbe rendere disponibili tali risorse di calcolo a tutti gli utenti del cluster ma, al contempo, garantire che i job accodati dagli utenti del gruppo di ricerca abbiano una priorità, ad esempio prevedendo un tempo massimo di attesa di 5 ore per la messa in esecuzione dei job degli utenti del gruppo di ricerca stesso. Il candidato esponga una configurazione, basata su 2 o più code, che possa rispondere alle esigenze qui espone.

Le eventuali limitazioni in termini di risorse che si dovessero rendere necessarie devono essere imposte agli utenti non appartenenti al gruppo di ricerca mentre questi ultimi dovrebbero poter operare senza alcun limite.

Quali suggerimenti daresti ai ricercatori per ottimizzare l'utilizzo delle risorse?

PROBLEMA 2

Valutazione acquisto server

Il gruppo di Fisica Teorica, composto da 15 PI, ha a disposizione una cifra di 40.000€ per acquistare dei nodi di calcolo da inserire sul cluster di ateneo. I nodi possono venire assemblati con le seguenti caratteristiche.

Cores	Ram (Gb)	Omnipath (incluso cavo di rete a bassa latenza)	Costo IVA inclusa (Eur)
96	256	No	12 819,76
96	512	No	14 615,60
96	1024	No	18 207,28
96	256	Sì	13 970,22
96	512	Sì	15 766,06
96	1024	Sì	19 357,74

Le linee di ricerca portate avanti dai diversi PI necessitano di risorse di tipo diverso. In particolare.

1. Circa un terzo dei PI necessita di macchine per fare simulazioni di dinamica molecolare o Monte Carlo. In queste simulazioni, la memoria richiesta è determinata dal numero di atomi o particelle da simulare. La loro performance è limitata dal numero dei processori a disposizione.
2. Un altro terzo dei PI necessita di macchine per simulazioni di sistemi quantistici. Queste simulazioni - in sostanza- sono basate su calcoli matriciali su matrici estremamente grandi e sono limitate soprattutto dalla memoria a disposizione.
3. Infine, l'ultimo terzo dei PI lavora con simulazioni a larga scala, basate su migliaia di cores. In genere queste simulazioni vengono effettuate su cluster europei (CINECA, Jülich,..) e sono limitate dal numero di core, memoria, e latenza delle comunicazioni internodo.

Il candidato argomenti che combinazione di nodi acquisterebbe con i 40.000€ a disposizione del gruppo, motivando la scelta in base alle necessità del gruppo.

PROBLEMA 3

Gestione storage server unix

Il gruppo di Fisica Teorica, composto da 15 PI, ha a disposizione 30 TB netti all'interno di uno spazio di storage composto da un certo numero di dischi in RAID6, gestito da uno storage server linux ospitato nel Data Centre di Ateneo all'interno del campus universitario e 10 TB all'interno di una Corporate Cloud nazionale, che permette di dare accesso anche ad utenti esterni. Discutere le politiche di gestione dei due storage a disposizione per ciò che riguarda i protocolli e le modalità di accesso ai dati, la loro protezione, la condivisione, ed in relazione ad un'equa ripartizione della risorsa tra gli afferenti al gruppo.

PROBLEMA 4

Git workflow integrato con gestione dati

Alcuni PI del gruppo teorico stanno sviluppando un template git (una serie di cartelle e sottocartelle) per facilitare la replicabilità e riproducibilità dei progetti computazionali, facendo in modo che il codice e gli script siano versionati e salvati su un repository git ed i dati contengano dei metadati necessari a ricostruire il codice ed i parametri utilizzati per generarli.

Un template minimale è basato su una struttura di base come la seguente

```
Progetto
├── AUTHORS.md
├── README.md
├── Visualizations
├── requirements.yml
├── data          # data files
├── doc           # documentation
├── draft        # latex sources for article
├── notebooks
├── references   # literature
├── src          # source code
└── test
```

La cartella `data`, contenente i dati, deve essere suddivisa in modo che l'utente possa scegliere se tenere solo i dati finali (analisi da riportare nei grafici) o anche tutti i dati grezzi delle simulazioni. Il candidato discuta come si può implementare un simile template facendo in modo che i dati siano recuperabili - non necessariamente versionati - da uno storage basato su google drive o da uno storage raggiungibile via ssh. Il candidato argomenti possibili aggiunte al template.

PROBLEMA 5

Valutazione acquisto GPU consumer vs Business

Parte del gruppo di Fisica Teorica utilizza vari software di simulazione molecolare che sfruttano le librerie CUDA in ambiente linux. La dinamica molecolare infatti è altamente parallelizzabile su GPU, avvantaggiandosi anche del fatto che molte operazioni sono eseguibili in singola precisione. Si è pertanto reso necessario acquisire dei sistemi hardware dotati di schede NVIDIA su cui eseguire tali software.

Da un'analisi di mercato sono state individuate due possibili soluzioni:

- L'acquisto di un server rackable in cui installare una scheda GPU NVIDIA TESLA V100 32GB
- L'acquisto di un server rackable o un server desktop in cui installare una scheda GPU NVIDIA GEFORCE RTX 3080

Di seguito alcuni dati tecnici indicativi utilizzati per identificare le due soluzioni di cui sopra:

	Geforce RTX 3080	Tesla V100
NVIDIA CUDA Cores	8704	5120
NVIDIA Tensor Cores	272	640
Frequenza	1.44 GHz	1.23 GHz
Consumo energetico	320 Watt	250 Watt
Prestazioni Single Precision	25 Tflops	14 Tflops
Prestazioni Double Precision	0,39 Tflops	7 Tflops
Memoria	10 GB	32 GB
Banda memoria	760.3 GB/s	900.0 GB/s
Prezzo	800€	11.200€

Si chiede di analizzare i vantaggi e gli svantaggi delle due soluzioni considerando sia il caso in cui la piattaforma venga usata come soluzione stand-alone, sia il caso in cui si decida di acquisire più sistemi identici e creare un cluster di calcolo.